「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」
平成 16 年度採択研究代表者

大石　進一

（早稲田大学理工学術院　教授）

「数値線形シミュレーションの精度保証に関する研究」

１．研究実施の概要

本研究では大きく次の2つを目標に研究を行っている。

(1) 数値線形シミュレーションツールを精度保証付きシミュレータへと性能向上させる理論とアルゴリズムを確立して、主要なシミュレータに実装して有効性を示す。

(2) 悪条件線形問題の解法アルゴリズムとポータブルかつ高速・高精度な精度保証アルゴリズムを開発し、既存有力シミュレータに実装して有効性を確認する。

以上の研究が達成されることにより、従来取り扱えなかった悪条件な数値線形代数の問題もシミュレータで必要最小限に近い手間で解け（解の存在、一意性の検証を含む）、得られた数値解の精度もほぼ過大評価なしに評価できるようになる。

これらを達成するためには以下の研究が不可欠である。

(a) 実問題に対して精度保証付きシミュレータを適用するために大規模な線形問題を高速に精度保証付きで解く方法の開発

(b) 悪条件な問題も取り扱えるようにするために高速・高精度な内積演算アルゴリズムの開発

(c) 上記で開発した手法にスケーラビリティ・ポータビリティを持たせるための枠組みの提案

本年度は、昨年度に引き続きこれらの課題に関する基礎的な部分の研究を行い、さらにその応用の研究も開始し、それぞれについて次の成果を得た。

(a) 数万次元の大規模な連立一次方程式の新しい精度保証アルゴリズムの開発（論文[5]）。実対称行列の固有値に対する高速な精度保証付き数値計算法の提案（論文[2]，学会発表）。Nekrasov 積分方程式の精度保証付き計算法の提案(論文[6])。疎行列を係数行列にもつ連立一次方程式の精度保証法の基礎的検討（学会発表）。二点境界値問題の数値計算についての数学的理論構築（論文[1]）。

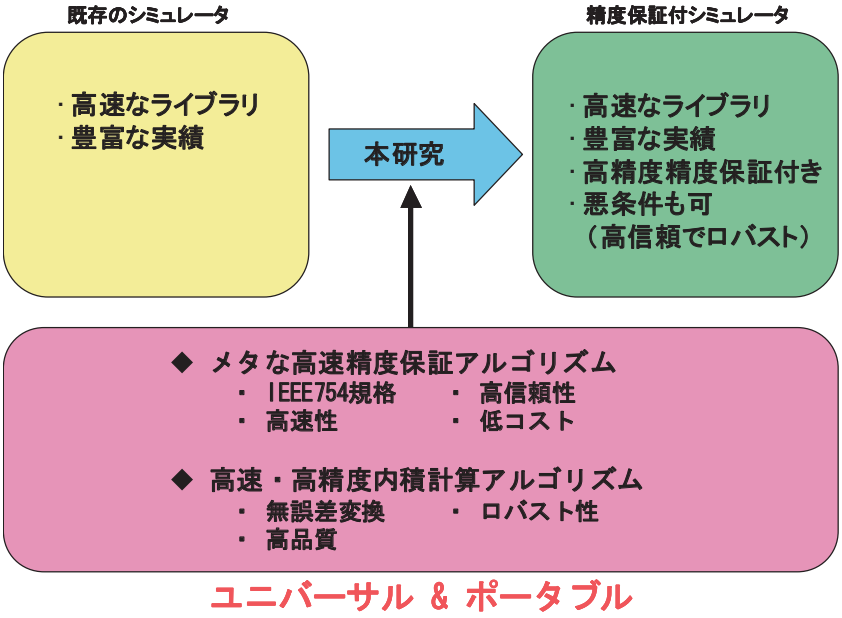
(b) ベクトルの総和や内積を通常の浮動小数点演算のみを用いて任意精度で高速に計算するポータブルなアルゴリズムの提案（論文[4]，学会発表）。悪条件線形方程式の精度保証付き数値計算法の提案（論文[3]，学会発表）。数値シミュレーションに現れる計算幾何学的問題のロバストかつ高速な解法（学会発表）。

(c) 有効丸めを用いない高速な精度保証付き数値計算法を応用した Java による連立一次方程式

のための成分毎に高精度な精度保証法(学会発表)。

2．研究実施内容

本研究全体では、数値線形シミュレーションツールを精度保証付きシミュレータへと性能向上させる理論とアルゴリズムを確立することを目的としている。



そのために、(a)実問題に適用可能な精度保証付きシミュレータの開発、(b)悪条件な問題にも対応できるロバストな計算アルゴリズムの開発、(c)シミュレータにスケーラビリティ・ポータビリティを持たせるための枠組みの提案、を具体的な目標とする。これらに対する研究成果の概要は§1の通りであるが、ここでは具体例として、2つの大きな成果が出た(b)を(b-1)と(b-2)に分けて以下で説明する。

(b-1) 1つは任意精度の高速なベクトルの総和及び内積計算アルゴリズムの開発である。今、ベクトル $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \cdots p_n)$の総和 sum($p$)を計算したいとする。ただし、各成分 p_iは浮動小数点数とする。ここで、Knuth の定理で示された2つの浮動小数点数 aと bの和をその浮動小数点数計算による近似値 xと正確な誤差 eの和に計算する関数を TwoSum として、$[x, e]$ = TwoSum(a, b)と表すことにする。このとき $a + b = x + e$が数学的な意味で正しく成立する。我々が開発した手法は

$[\pi_1, q_1]$ =TwoSum (p_1, p_2), $[\pi_2, q_2]$ =TwoSum (p_3, π_1), ・・・, $[\pi_n, q_{n-1}]$ =TwoSum (p_n, π_{n-1})

と計算するものである。このとき、π_n+sum($\mathbf{q}$) = sum(p)が成立する。これをベクトル総和の無誤差変換(Error-free Transformation)と名付けた。$\mathbf{p}' = (q_1, q_2, \cdots q_{n-1}, \pi_n)$として、再び無誤差変換を繰り返すことができる(**図 1**)。これが反復ごとに誤差限界が必ず良くなることを数値実験により発見し、理論的にもこれを証明した。内積計算はベクトル総和の問題に帰着できる。我々はこのアルゴリズムを洗練させ、従来の最高速の手法に対して理論的かつ実験的に約40%高速であることを示した。

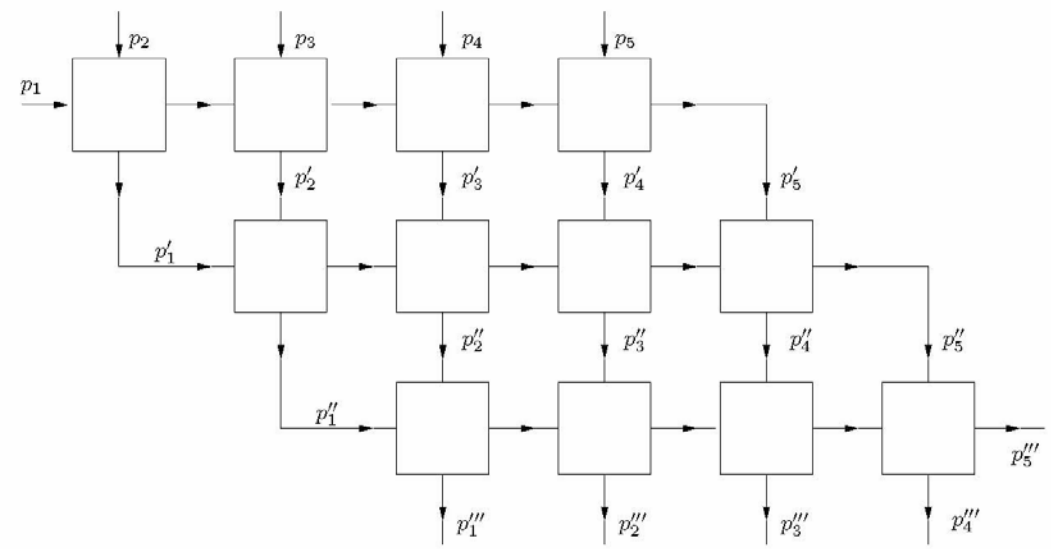


図 1: ベクトル総和の無誤差変換

(b-2) もう1つは、悪条件(条件数が非常に大きい)な連立一次方程式のための精度保証付き数値計算法の開発である。これによって、少なくとも数十～数百次元の小規模な問題に対しては任意に条件数の大きい場合でも実用的な計算コストで対処可能となった。これは、(b-1)のような成果が基礎となっており、その応用例の 1 つでもある。これについては、今後、より大規模なシステムで性能評価をする必要がある。

また、(a), (c)については、以下のように計算環境が大きく進化したことにより、開発したアルゴリズムをシミュレータへ実装した際の性能評価、特に実用的なスケーラビリティの評価が可能となった。

本年度購入した Orion Multisystem 社製のクラスタシステム(96CPU, 300Gflops peak)は、筐体がデスクトップ PC より一回り大きい程度で、研究室の限られたスペースでハイパフォーマンスコンピューティングやスケーラビリティの評価等の利用に役立てている(**図 2**)。これにより、精度保証付き数値シミュレータの実装検証が実用レベルで可能となった。例えば、本システムに分散並列線形計算ライブラリ ScaLAPACK を導入し、大規模な密行列系・疎行列系の線形問題の精度保証付き数値計算に使用している。

図 2: Orion クラスタシステム (96CPU)

結論として、本年度の目標は当初の予定通り達成できていると思われる。今後も研究計画に従い、本研究の目的を達成するために革新的なアイディアを生みながら研究を推進していきたい。

３．研究実施体制

「精度保証」グループ

①研究分担グループ長：大石　進一（早稲田大学、教授）

②研究項目：大規模線形問題の精度保証付き数値計算法の開発とシミュレータへの適用

４．主な研究成果の発表

（１）　論文（原著論文）発表

○ T. Yamamoto, S. Oishi: A Mathematical Theory for Numerical Treatment of Nonlinear Two-Point Boundary Value Problems, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 23:1 (2006), 31-62.

○ 宮島 信也，荻田 武史，大石 進一: 実対称行列の各固有値に対する精度保証付き数値計算法，日本応用数理学会論文誌, 15:3 (2005), 253-268.

○ 太田 貴久，荻田 武史, S. M. Rump，大石 進一: 悪条件連立一次方程式の精度保証付き数値計算法，日本応用数理学会論文誌, 15:3 (2005), 269-287.

○ T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Accurate Sum and Dot Product, SIAM Journal on Scientific Computing, 26:6 (2005), 1955-1988.

○ 荻田 武史，大石 進一: 大規模連立一次方程式のための高速精度保証法，情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用, 46:SIG10 (TOM12) (2005), 10-18.

○ S. Murashige, S. Oishi: Numerical Verification of Solutions of Nekrasov's Integral Equation, Computing, 75:1 (2005), 15-25.